

ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ
ΣΧΟΛΗ ΓΕΩΤΕΧΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΚΑΙ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ



Πτυχιακή διατριβή

ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑ ΠΥΡΗΝΩΝ ΔΙΟΞΕΙΔΙΟΥ ΤΟΥ
ΑΝΘΡΑΚΑ ΣΕ ΥΔΑΤΙΚΑ ΑΕΡΟΛΥΜΑΤΑ ΥΠΟ ΤΗΝ
ΠΑΡΟΥΣΙΑ ΜΕΘΑΝΟΛΗΣ ΚΑΙ DMSO

ΦΩΣΤΗΡΑ ΠΑΝΑΓΙΩΤΟΥ

Λεμεσός 2014

ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ
ΣΧΟΛΗ ΓΕΩΤΕΧΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΚΑΙ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ
ΤΜΗΜΑ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ
ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ

Πτυχιακή διατριβή

ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑ ΠΥΡΗΝΩΝ ΔΙΟΞΕΙΔΙΟΥ ΤΟΥ
ΑΝΘΡΑΚΑ ΣΕ ΥΔΑΤΙΚΑ ΑΕΡΟΛΥΜΑΤΑ ΥΠΟ ΤΗΝ
ΠΑΡΟΥΣΙΑ ΜΕΘΑΝΟΛΗΣ ΚΑΙ DMSO

ΦΩΣΤΗΡΑ ΠΑΝΑΓΙΩΤΟΥ

Επιβλέπων καθηγητής

Δρ. ΕΥΑΓΓΕΛΟΣ ΔΑΣΚΑΛΑΚΗΣ

Λεμεσός 2014

Πνευματικά δικαιώματα

Copyright © Φωστήρα Παναγιώτου, 2014

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Η έγκριση της πτυχιακής διατριβής από το Τμήμα Γεωτεχνικών Επιστημών και Διαχείρισης Περιβάλλοντος του Τεχνολογικού Πανεπιστημίου Κύπρου δεν υποδηλώνει απαραίτητως και αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα εκ μέρους του Τμήματος.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η υλοποίηση αυτής της πτυχιακής πραγματοποιήθηκε στο εργαστήριο Υπολογιστικής Χημείας του τμήματος Επιστήμη Περιβάλλοντος και Τεχνολογίας, στο Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου με την υποστήριξη ενός αριθμού ανθρώπων στους οποίους θα ήθελα να στείλω τις θερμότερες ευχαριστίες μου. Πρώτα από όλους θα ήθελα να ευχαριστήσω τον καθηγητή μου Δρ. Ευάγγελο Δασκαλάκη για την καθοδήγηση και υποστήριξη του καθ' όλη την διάρκεια διεκπεραίωσης της παρούσας διπλωματικής και για την διαρκή και σχολαστική παρακολούθηση της προόδου του ερευνητικού θέματος. Χρωστάω επίσης ένα μεγάλο ευχαριστώ στη μεταπτυχιακό Φεβρωνία Χαραλάμπους για την άριστη συνεργασία που είχαμε, τον πολύτιμο χρόνο που διάθεσε και για τα σημαντικά στοιχεία και εξηγήσεις πάνω στο θέμα, για την προθυμία και βοήθεια που δεν δίστασε να μου δώσει. Εν συνέχεια θα ήθελα να ευχαριστήσω την συμφοιτήτρια μου Ειρήνη Νεάρχου για την συνεργασία που είχαμε για την εκπόνηση των εργασιών μας, τις λύσεις και ιδέες που παρείχε όπου χρειάστηκε. Τέλος, αναμφίβολα θα ήθελα να ευχαριστήσω το κοντινό, φιλικό και οικογενειακό μου περιβάλλον για την στήριξη και εμπιστοσύνη που μου έδειξαν όλα αυτά τα χρόνια των σπουδών μου και της μέχρι τώρα σταδιοδρομίας μου.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η παρούσα διπλωματική είχε ως στόχο την μελέτη της δυναμικής του διοξειδίου του άνθρακα σε υδατικά αερολύματα με την μεθοδολογία της Μοριακής Δυναμικής και Μηχανικής. Η αλληλεπίδραση των ατμοσφαιρικών φάσεων του νερού με το διοξείδιο του άνθρακα, καθώς και η συμβολή τους στη δημιουργία νεφών κρίνονται σημαντικοί παράγοντες που επιδρούν στο pH της βροχής. Στην παρούσα διατριβή ελέγχεται η επίπτωση οργανικών ειδών στη διαλυτότητα του διοξειδίου του άνθρακα και εξάγονται συμπεράσματα για τις επιπτώσεις στο pH της βροχής

ABSTRACT

We report on the Carbon Dioxide solubility in wet aerosols by Molecular Dynamics Simulations. The interaction between atmospheric water phases and carbon dioxide, as well as the organic content in Cloud Condensation Nuclei (CCN), have been implicated in the acidity of rainwater. In this thesis, we probe the effects of two organic molecules on carbon dioxide solubility and correlate the results to the pH of rainwater.